Comparaison du Modèle Fluide de Décharge Radiofréquence dans l'Argon à la Simulation de Monte Carlo

A. Aissaoui, D. Benyoucef, B. Belmadani Département d'Electrotechnique, Université de Chlef
A. Hennad , Département d'Electrotechnique, U.S.T.O. Oran.

Résumé: Une comparaison est faite entre le modèle fluide et la simulation de monte Carlo d'une décharge radiofréquence dans l'argon . L'accord dans les propriétés prédites par les deux modèles est examiné pour une pression de 1 torr et une tension de 300 v . Un accord quantitatif a été trouvé dans le comportement général de la décharge prédit par le modèle fluide et la simulation Monte Carlo à cette pression et cette tension.

I. INTRODUCTION

Les application industrielles des décharges électriques ont trouvé une large diffusion dans différents secteurs industriels . Elles ont envahi des domaines d'importance vitale, tels que l'industrie micro-électronique, en faisant fin aux techniques traditionnelles.

L'utilisation des décharges luminescentes radio-fréquences (> 100 Khz) à basse ou moyenne pression est un moyen très efficace pour créer des plasmas à basse température (plasmas froids) . De tels plasmas réactifs sont utilisés dans la gravure et le dépôt des couches minces qui représentent deux étapes fondamentales dans la fabrication des circuits intégrés .

La connaissance des mécanismes physiques et chimiques se déroulant dans le plasma des décharges radiofréquence est indispensable pour l'optimisation des réacteurs à plasmas . Une meilleure compréhension de ces mécanismes complexes ne peut être obtenue que par la modélisation .

En effet, plusieurs modèles ont été développés dans ce contexte. Ils peuvent être classés en deux catégories : les modèles microscopiques ou cinétiques[1] et les modèles macroscopiques ou fluides [2] - [10].

Les modèles microscopiques (cinétiques) sont basés sur la résolution directe de l'équation de Boltzmann par des méthodes des différences finies ou des éléments finis ou indirectement par des simulations de Monte Carlo. Comme inconvénient, ces modèles sont beaucoup consommateurs de temps surtout à pressions élevées.

Les modèles macroscopiques ou fluides, utilisés à des pressions élevées, font intervenir à la place de l'équation de Boltzmann les moments d'ordre zéro, un et deux de cette équation couplés à l'équation de Poison. Ces modèles sont rapides .

Les modèles cinétiques donnent la fonction de distribution des vitesses ou des énergies des particules chargées . Par contre, les modèles macroscopiques donnent des valeurs moyennes des densités et des vitesses moyennes des particules chargées, en supposant une distribution maxwelliane des énergies des électrons . Dans ce travail, on présente une comparaison des prédictions du modèle fluide et celles d'une simulation de Monte Carlo d'une décharge luminescente radiofréquence dans l'Argon (gaz électropositif) à une pression de 1 torr. La formulation des modèles est décrite dans la section 2 . La section 3 contient les résultats et les prédictions de chaque modèle. Finalement, une conclusion est donnée dans la section 4 .

II. DESCRIPTION DES MODELES

A. Simulation de Monte Carlo

La simulation de Monte Carlo utilisée dans ce travail est décrite en détail dans la référence [1]. Brièvement, cette méthode consiste à simuler les collisions entre particules (électrons-atomes , ions-atomes) par un tirage de nombres aléatoires et retracer l'historique de chaque particule depuis sa création jusqu'à sa disparition.

Les électrons commencent leur mouvement à partir de la cathode avec une énergie, en moyenne, égale à 4 eV. la direction de chaque électron, définie par l'angle axial θ et l'angle radial φ, est donnée par:

$$\cos\theta = R_1 \quad , \quad \varphi = 2\pi \cdot R_2$$

où R_1 et R_2 sont des nombres tirés de l'intervalle (0,1).

Les vitesses initiales sont calculées à partir de l'énergie E et les angles θ et φ :

$$\begin{aligned} V_{x0} &= \sin\theta\cos\varphi\sqrt{\frac{2E}{m_e}}, \\ V_{y0} &= \sin\theta\sin\varphi\sqrt{\frac{2E}{m_e}} \\ V_{z0} &= \cos\theta\sqrt{\frac{2E}{m_e}} \end{aligned} \quad (1)$$

Le mouvement des électrons, sous l'action du champ axial E_z , est déterminé par les lois de la mécanique classique :

$$\begin{aligned} x &= x_0 + V_{x0}\cdot\Delta t \\ y &= y_0 + V_{y0}\cdot\Delta t \\ z &= z_0 + V_{z0}\cdot\Delta t - \frac{eE_z}{2m_e}\cdot(\Delta t)^2 \end{aligned} \quad (2)$$

et

$$\begin{aligned} V_x &= V_{x0} \\ V_y &= V_{y0} \\ V_z &= V_{z0} - \frac{eE_z}{m_e}\cdot\Delta t \end{aligned} \quad (3)$$

où x_0, y_0, z_0 et x, y, z sont les coordonnées des électrons aux instants t et t + Δt respectivement, V_{x0}, V_{y0}, V_{z0} et V_x, V_y, V_z sont les vitesses correspondantes et m_e et e sont respectivement la masse et la charge de l'électron.

Le champ axial E_z est obtenu par la résolution de l'équation de Poisson :

$$\frac{dE_z}{dz} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad (4)$$

ρ étant la charge d'espace et ε_0 la permittivité du vide.

Après l'expiration du temps Δt (pas de temps), la probabilité de collision est calculée par un tirage d'un nombre aléatoire R_3. Si une collision a lieu, le type de collision (élastique, ionisation, excitation) est déterminée par un tirage d'un nombre aléatoire R_4 .Dépendant du type de collision, les nouvelles énergie et directions sont calculées . Le mouvement d'électron, après le choc et pendant un pas de temps Δt, est décrit de nouveau par les lois de Newton. Cette procédure est répétée jusqu'à ce que cet électron entre en collision avec les parois.

Dans le cas de collisions ionisantes, le transport des nouveaux électrons et les ions positifs correspondant est décrit, de la même façon que précédemment, par la méthode de Monte Carlo. Seules les collisions de type élastique et transfert de charge sont considérées dans la simulation du mouvement des ions positifs.

B. Modèle fluide

Le modèle fluide utilisé dans cette étude est unidimensionnel et similaire à celui utilisé par Gogolides dans le référence [8]. Les équations issues des trois premiers moments de l'équation de Boltzmann sont:

– les équations de continuité des électrons et des ions positifs :

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial j_e}{\partial x} = k_i N n_e \qquad (5)$$

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} + \frac{\partial j_p}{\partial x} = k_i N n_e \qquad (6)$$

où n_e , n_p , j_e et j_p représentent les densités et les flux des électrons et des ions positifs. N étant la densité du gaz que l'on suppose rester constante. k_i représente le coefficient d'ionisation.

– les équations de transfert de quantité de mouvement des électrons et des ions positifs :

$$j_e = -D_e \cdot \frac{\partial n_e}{\partial x} - \mu_e n_e E \qquad (7)$$

$$j_p = -D_p \frac{\partial n_p}{\partial x} + \mu_p n_p E^{ef} \qquad (8)$$

D_e , D_p , μ_e et μ_p représentent respectivement le coefficient de diffusion et la mobilité des électrons et des ions positifs. E^{ef} est le champ que voient réellement les ions positifs , car le mouvement de ces derniers (particules lourdes) est en retard de phase par rapport au champ électrique appliqué E. Ce champ effectif E^{ef} est exprimé par l'équation [2] :

$$\frac{\partial E^{ef}}{\partial t} = \nu^{ef}(E - E^{ef}) \qquad (9)$$

où $\nu^{ef} = \frac{e}{\mu_i m_i}$ représente la fréquence effectif de transfert de quantité de mouvement.

– l'équation d'énergie des électrons:

$$\frac{\partial (n_e \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = eEj_e - k_L N n_e \qquad (10)$$

où ε représente l'énergie moyenne des électrons. k_L étant le coefficient de perte d'énergie des électrons. q représente le flux d'énergie électronique et peut être donné par la formule approchée suivante[8]:

$$q \cong \frac{5}{3} j_e \varepsilon - n_e D_e \frac{\partial \varepsilon}{\partial x}$$

Ces équations doivent être couplées à l'équation de Poisson:

$$\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = \frac{e}{\varepsilon_0}(n_e - n_p) \qquad (11)$$

$$E = -\frac{\partial V}{\partial x} \qquad (12)$$

Le coefficient d'ionisation k_i peut être exprimé en fonction de l'énergie moyenne des électrons par [8]:

$$k_i = 8{,}7 \times 10^{-9}(\varepsilon - 5{,}3)\exp(-4{,}9 / (\varepsilon - 5{,}3)^{\frac{1}{2}}) \qquad (13)$$

pour $\varepsilon > 5{,}3$ev . k_i est supposé nul pour $\varepsilon \le 5{,}3$ev .

Le coefficient de perte d'énergie k_L peut être aussi exprimé en fonction de l'énergie moyenne des électrons par [8]:

$$k_L = e\mu_e N\left(\frac{E}{N}\right)^2 - k_i\left(\frac{5}{3}\varepsilon + \frac{eD_e}{\mu_e}\right) \qquad (14)$$

Nous considérons une décharge radiofréquence à électrodes parallèles qui s'étend de x=0 à x=L. On applique à l'électrode de gauche (x=0). un potentiel rf:: $v(t) = v_{rf}\sin(\omega_{rf} t)$. L'électrode de droite est mise à la terre (x=L). Les densités des électrons, des ions positifs sont supposées nulles aux électrodes. L'énergie électronique est supposée égale 1ev aux électrodes

III . RESULTATS

Dans cette section, nous présenterons les résultats des deux modèles (fluide et cinétique) d'une décharge rf dans l'argon (gaz électropositif) à une pression de 1 Torr. Une tension de 300v de crête et 10 Mhz de fréquence est appliquée à l'électrode de gauche (x = 0) . L'électrode de droite (x = L) est mise à la terre. L'espace entre électrodes est pris égal à 2 cm . L'émission électronique secondaire aux électrodes est supposée nulle (γ=0).

Les paramètres de transport de l'argon utilisé dans le modèle fluide (tirés de l'article de Gogolides[8]), sont :

$D_e = 120\times10^4$ cm^2 .Torr/ s , $\mu_e = 30\times10^4$ cm^2 .Torr / v .s ,

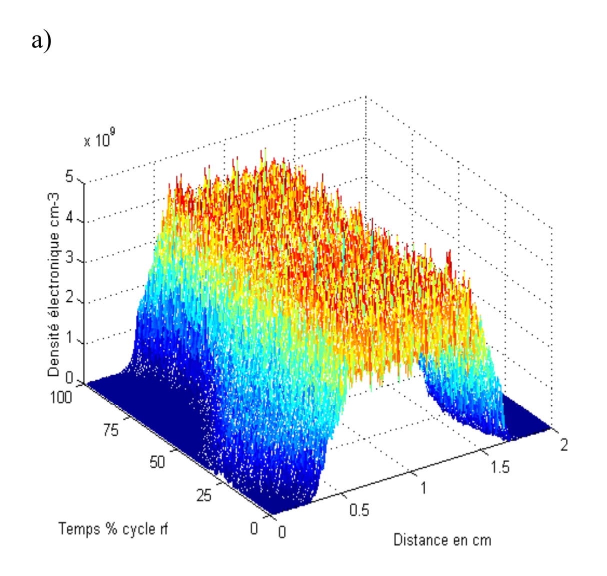
$D_p = 40.0$ cm^2. Torr / s et $\mu_p = 14.44\times10^2$ cm^2.Torr / v.s.

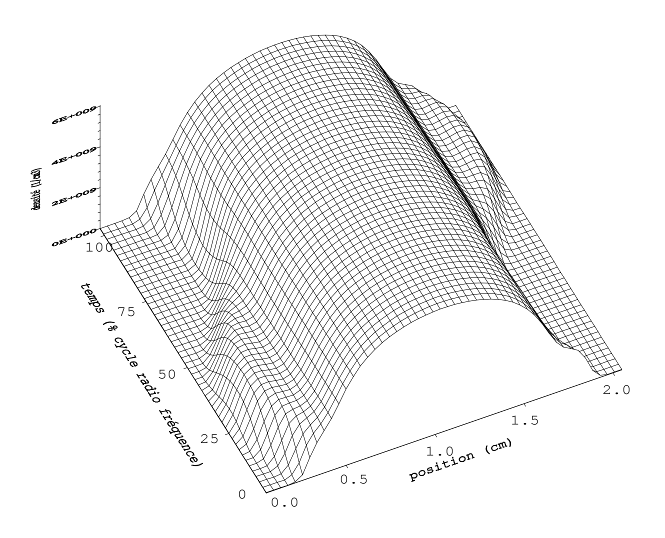
Les sections efficaces d'ionisation , d'excitation et des collisions élastiques électron-atome utilisées dans la simulation de Monte Carlo sont calculées par le code BOLZIG [11].

La section efficace de transfert de charge ion-atome est prise constante et égale à 10^{-15} cm^2 [12]. Quant à la section efficace de collision élastique ion-atome est 29.10^{-16} cm^2 (calculée).

Les figures 1(a) et 1(b) représentent respectivement les variations spatio-temporelles de la densité des électrons prédites par le modèle fluide et la simulation de Monte Carlo. Les deux modèles prédisent la même forme et la même allure des variations de la densité électronique. Le balayage des électrons vers le plasma se produit au mêmes moments du cycle rf dans les deux simulations. La densité électronique, dans le plasma, est de 6×10^{9} cm^{-3} d'après le modèle fluide et de 4×10^{9} cm^{-3} dans la simulation de Monte Carlo. Ce qui prouve qu'il y a un accord quantitatif et qualitatif entre les deux modèles dans la description des électrons.

a)



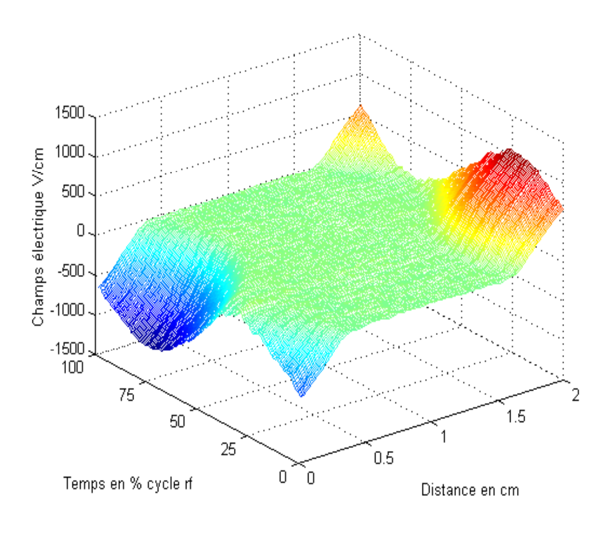


b)

FIG.1: Variations spatio-temporelles de la densité des électrons dans une décharge luminescente radiofréquence dans l'argon pour les conditions suivantes: p = 1 torr, V = 300 v , f = 10 Mhz, et d = 2 cm., a) simulation de M.C, b). modèle fluide

Les figures 2(a) et 2(b) présentent les variations spatio-temporelles du champ électrique. Les deux modèles prédisent la même distribution du champ électrique que ce soit dans les gaines ou dans le plasma. Ils prédisent, aussi, le même signe et presque la même amplitude du champ électrique pendant le balayage des électrons du ou vers le plasma. Ce qui permet d'affirmer d'avantage l'accord , entre le modèle fluide et la simulation de Monte Carlo à ces conditions.

a)



b)

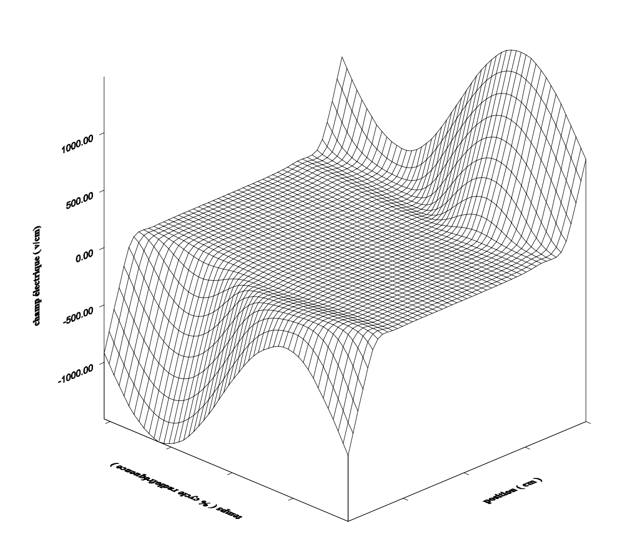
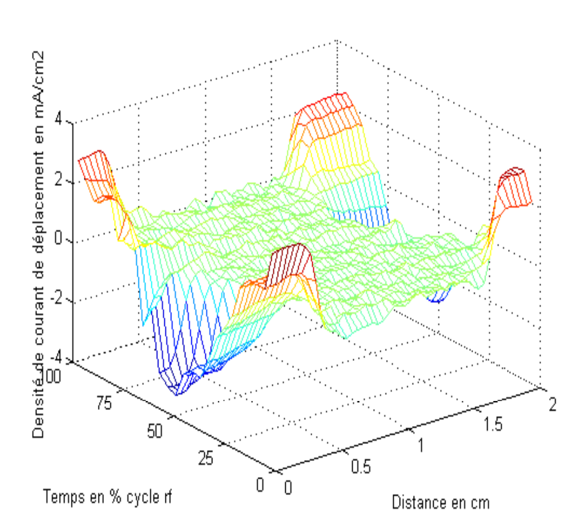


FIG.02: Variations spatio-temporelles du champ électrique dans une décharge luminescente radiofréquence dans l'argon pour les conditions suivantes: p = 1 torr, V = 300 v , f = 10 Mhz, et d = 2 cm., a) simulation de M.C, b) modèle fluide

Les deux modèles prédisent le même courant de déplacement (voir figures 3 (a) et 3 (b)) puisqu'ils donnent la même distribution du champ électrique. En effet, presque la même valeur maximale du courant de déplacement dans les gaines (3,6 mA/cm^{-2} pour le modèle fluide et 3 mA.cm^{-2} pour la simulation de M.C.) est prédite par les deux modèles. Le courant de déplacement dans le plasma est quasiment nul dans les deux modèles (champ faible et quasiment constant dans le plasma).

a)



b)

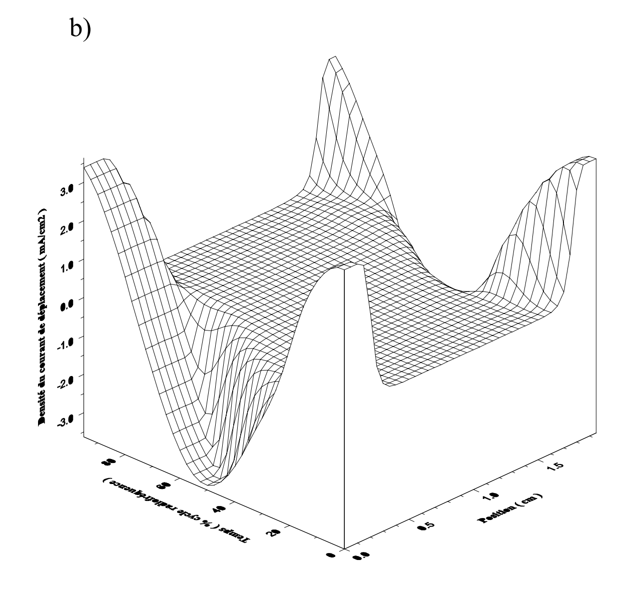
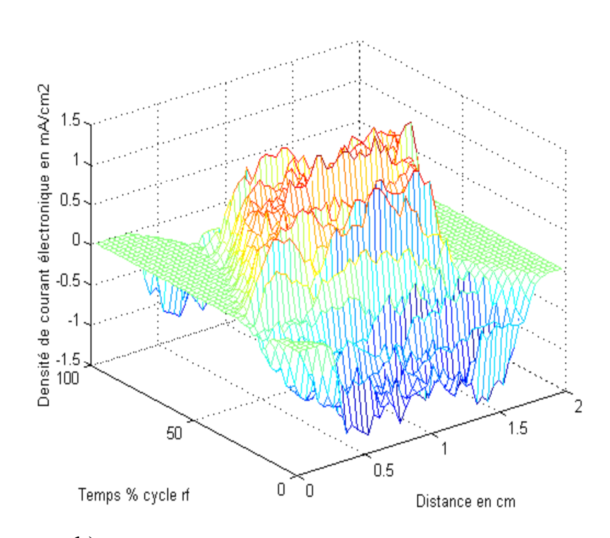


FIG.04: Variations spatio-temporelles du courant électronique dans une décharge luminescente radiofréquence dans l'argon pour les conditions suivantes: p = 1 torr, V = 300 v , f = 10 Mhz, et d = 2 cm., a) simulation de M.C, b)) modèle fluide.

Le profile du courant électronique présente la même allure dans les deux modèles (voir fig. 4 (a) et 4 (b)). Il est important dans le plasma (densité électronique maximale dans le plasma). et faible ou même nul dans les gaines (électrons balayés vers le plasma).

a)



b)

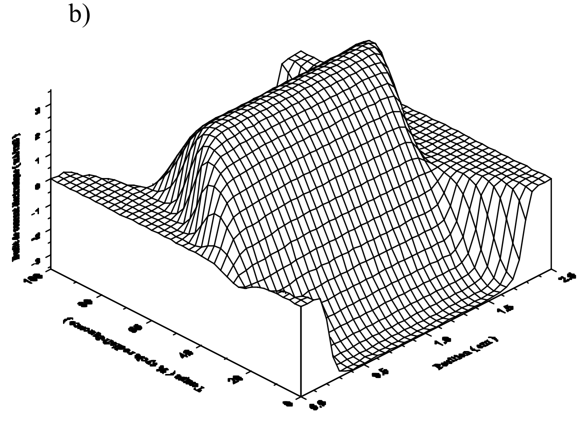
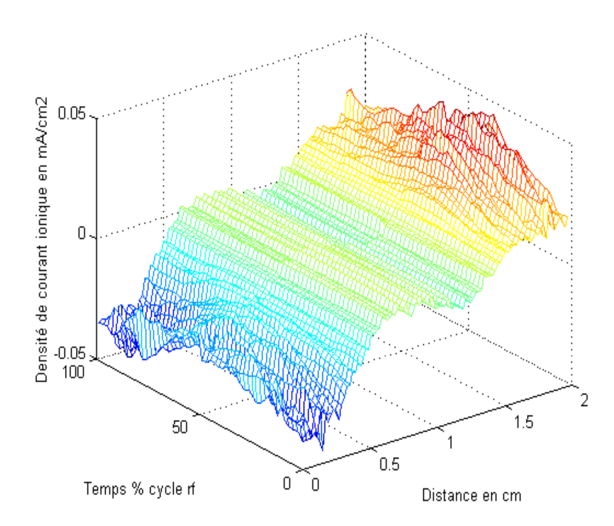


FIG.04: Variations spatio-temporelles du courant électronique dans une décharge luminescente radiofréquence dans l'argon pour les conditions suivantes: p = 1 torr, V = 300 v , f = 10 Mhz, et d = 2 cm., a) simulation de M.C ,b) modèle fluide

Quant au courant ionique, les deux modèles prédisent des valeurs relativement faibles dans les gaines(0.06 mA/cm^2 dans la modélisation fluide et 0.04 mA/cm^2 dans la simulation de M.C.) et des valeurs plus faibles (presque nulles) dans le plasma.

a)



b)

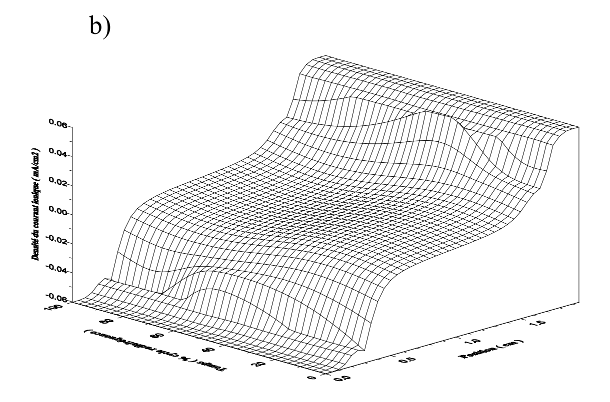


FIG.05: Variations spatio-temporelles du courant ionique dans une décharge luminescente radiofréquence dans l'argon pour les conditions suivantes: p = 1 torr, V = 300 v , f =10 Mhz, et d = 2 cm., a) simulation de M.C, b)) modèle fluide.

III. CONCLUSION

Dans l'ensemble , les prédictions faites par les deux modèles (modèle fluide et simulation de Monte Carlo) , concernant la densité électronique , le champ électrique , le courant de déplacement , le courant électronique et le courant ionique sont qualitativement et quantitativement en bon accord . Ce qui prouve la validité du modèle fluide , utilisé dans ce travail , à la pression de 1 torr .

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES:

[1] D. Benyoucef, ''Modélisation d'une décharge luminescente : aspect microscopique'', mémoire de magister, soutenu en 2002, C.U.Laghouat .

[2] A. D. Richards, B. E. Thompson and H. H. Sawin "Continuum modeling of argon radio-frequency glow discharges" Appl. Phys. lett., Vol. 50,No. 9, 2 march 1987, p. 492-494

[3] J. P. Bœuf , "Numerical model of rf glow discharges", Phys. Rev. A, Vol. 36, No.6, 15 september 1987, p. 2782-2792.

[4] Yong-Ho Oh, Nak-Heon Choi and Duk-In choi, "A numerical simulation of rf glow discharge containing an electronegative gas composition", J. Appl. Phys., Vol. 67, No. 7, 1 April 1990, p. 3264-3268.

[5] Sang-Kyu Park and Demetre J. Economou, "Analysis of low pressure rf discharges using a continuum model" J. Appl. Phys., Vol. 68, No.8, 15 October 1990, p. 3904-3915.

[6] M. Neyyapan, "Continuum model for low-pressure radio-frequency discharges", J. Appl. Phys., Vol. 69, No.12, 15 June 1991, p.8047-8051.

[7] J. D. P. Passchier and W. J. Goedheer, "Relaxation phenomena after laser-induced photodetachement electronegative rf discharges", J. Appl. .Phys, Vol. 73, No.3, 1 February 1993, p. 1073-1079.

[8] E. Gogolides and H. H. Sawin, "Continuum modeling of radio-frequency glow discharges. I. Theory and results for electropositive and electronegative gases", J. Aplpl. Phys., Vol. 72, No. 9, 1 November 1992, P. 3972-3987.

[9] Fongray Frank Young and Chan-Hwa wu, "Comparaison of one- and two-dimensionnal three-moment fluid models for rf glow discharges", J. Appl. Phys., Vol. 74, No. 2, 15 February 1993, p. 839-847.

[10] J. D. P. Passchier and W. J. Goedheer, "A two dimensionnal fluid model for an argon rf discharges", J. Appl. Phys., Vol. 74, No. 6, 15 September 1993, P. 3744-3750.

[11] J.P. Boeuf and L.C. Pitchford ,"BOLSIG code", CPAT, 1996 .

[12] M. Ardehali, H. Matsumoto, IEEE,Trans. Plasma Sci.25 (1997), P 1081.